

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ СВЕТА С ТОРОИДНЫМИ КОЛЕБАНИЯМИ В ПОЛЯРНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Ю.В.Конаев, В.В.Тугушев

Исследованы особенности взаимодействия света с колебаниями плотности тороидного момента зонных электронов. Предложено объяснение необычных спектральных характеристик коэффициента поглощения света TlGaSe_2 ¹, предсказывается их аномальное изменение в магнитном поле. Обсуждается возможность наблюдения аналогичных особенностей в антиферромагнетиках с локальными моментами.

1. Настоящая работа посвящена рассмотрению оптических свойств кристаллов, близких к тороидному фазовому переходу². Последний характеризуется возникновением особого типа антиферромагнитного упорядочения зонных электронов с отличным от нуля тороидным моментом \mathbf{T} ³. Тороидные моменты вводятся в классической электродинамике в качестве независимого семейства мультиполей при разложении поперечной плотности тока $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ ³. Тороидный дипольный момент \mathbf{T} , называемый ниже для краткости просто тороидным моментом, определяется соотношением:

$$\mathbf{T} = \frac{1}{10c} \int \{ \mathbf{r}(\mathbf{j}\mathbf{r}) - 2r^2\mathbf{j} \} d\mathbf{r}$$

c – скорость света. Переход в тороидное состояние можно связать с размягчением определенной моды коллективных электронных колебаний в кристалле⁴, причем эта мода может взаимодействовать со светом в инфракрасной области спектра. Следовательно, при приближении к точке тороидной неустойчивости можно надеяться обнаружить особенности в спектральных характеристиках системы, и в частности, в коэффициенте оптического поглощения $K_{\mathbf{T}}(\omega)$. Будет показано, что из-за специфического характера взаимодействия тороидного момента с электромагнитным полем³ поведение $K_{\mathbf{T}}(\omega)$ вблизи точки тороидного перехода радикально отличается от аналогичной зависимости $K_{\Phi}(\omega)$ при рассеянии света на мягкой фононной моде в случае структурного фазового перехода. Кроме того, зависимость $K_{\mathbf{T}}(\omega)$ весьма значительно изменяется в магнитном поле, что позволяет выделить вклад тороидных колебаний в случае сложных спектральных характеристик.

2. Функция Лагранжа системы, в которой низкочастотные тороидные колебания взаимодействуют с электромагнитным полем, имеет вид:

$$\mathcal{L}_{\mathbf{T}} = K - U \quad (1)$$

$$K = \frac{(\dot{\mathbf{T}})^2}{2M_{\mathbf{T}}}, \quad U = \alpha_{\mathbf{T}} \mathbf{T}^2 + \xi \mathbf{T} \dot{\mathbf{E}}, \quad (2)$$

где $\alpha_{\mathbf{T}}, M_{\mathbf{T}}, \xi > 0$ – коэффициенты, вычисляемые в микроскопической модели (см., например,²), \mathbf{T} – плотность тороидного момента, \mathbf{E} – напряженность электрического поля. Особенность взаимодействия тороидного момента \mathbf{T} с полем \mathbf{E} в² приводит к необычной спектральной зависимости диэлектрической восприимчивости $\chi(\omega)$. Варьируя (1) по \mathbf{T} , получим динамическое уравнение движения:

$$-\frac{\ddot{\mathbf{T}}}{2M_{\mathbf{T}}} - \alpha_{\mathbf{T}} \mathbf{T} - \gamma_{\mathbf{T}} \dot{\mathbf{T}} = \frac{\xi}{2} \dot{\mathbf{E}}. \quad (3)$$

Здесь мы добавили в левую часть (3) член $\gamma_{\mathbf{T}} \dot{\mathbf{T}}$, описывающий затухание в системе тороидных моментов (микроскопическое обоснование дано в работе,⁴ где использовалось обоз-

начение $\vec{\pi}$ вместо Γ). Используя (2) и (3), получим:

$$\chi(\omega) = -\frac{1}{2} \frac{\xi^2 \omega^2}{\frac{\omega^2}{2M_T} - \alpha_T - i\gamma_T \omega} \quad (4)$$

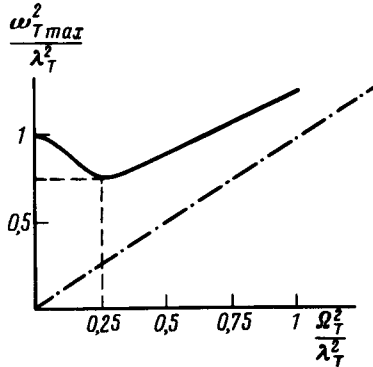
Здесь использовано выражение для поляризации системы $\mathbf{P} = \xi \dot{\Gamma}$, следующее из (2). Подробнее электрические свойства нестационарного тороидного момента обсуждались в ⁵.

Коэффициент поглощения $K_T(\omega)$ пропорционален $\text{Im} \chi(\omega)$ и имеет, следовательно, вид:

$$K_T(\omega) \sim \frac{\omega^3}{(\omega^2 - \Omega_T^2)^2 + \lambda_T^2 \omega^2}, \quad (5)$$

$$\lambda_T = 2M_T \gamma_T, \quad \Omega_T^2 = 2M_T \alpha_T.$$

Специфика выражений (4) и (5) состоит в необычной зависимости числителя от частоты света ω . В случае обычных полярных колебаний силы осцилляторов не зависят от частоты и $\chi(\omega) \sim (\omega^2 - \Omega_\phi^2 - i\gamma_\phi \omega)^{-1}$.



Максимум $K_T(\omega)$ находим из условия $\partial K_T / \partial \omega = 0$, которое дает:

$$\omega_{Tmax}^2(\Omega_T) = \left[\left(\Omega_T^2 - \frac{\lambda_T^2}{2} \right)^2 + 3\Omega_T^4 \right]^{1/2} - \left(\Omega_T^2 - \frac{\lambda_T^2}{2} \right). \quad (6)$$

Зависимость $\omega_{Tmax}^2(\Omega_T)$ изображена на рисунке. Видно, что $\omega_{Tmax}^2 \neq 0$ при любых значениях Ω_T , в том числе и при $\Omega_T \rightarrow 0$ ($\omega_{Tmax}^2(0) \rightarrow \lambda_T^2$). Наименьшее значение ω_{Tmax}^2 достигается при $\Omega_T^2 = \lambda_T^2/4$, $\omega_{Tmax}^2(\lambda_T/2) = 3/4 \lambda_T^2$. Если $\Omega_T \gg \lambda_T$, то $\omega_{Tmax}^2 \approx \Omega_T^2$, и пропорциональна частоте мягкой моды. Таким образом, при понижении Ω_T пик поглощения $K_T(\omega)$ вначале смещается в область малых частот, а затем при $\Omega_T < \lambda_T/2$ начинает двигаться в противоположном направлении. Именно такое поведение $K(\omega)$ наблюдалось в кристалле TlGaSe_2 для одной из мягких мод колебаний. При этом дело осложнялось наличием еще одной мягкой моды, для которой частота $\omega_{\phi max}$ монотонно уменьшалась с понижением температуры. Можно предположить, что в TlGaSe_2 происходит структурный фазовый переход, при котором размягчается фононная мода ($\omega_{\phi max} \rightarrow 0$ при $T \rightarrow T_c$, а частота тороидной моды остается малой, но конечной $\Omega_T \sim \lambda_T/2$). В этой связи было бы интересно проследить поведение этой моды ниже точки структурного перехода при $T \ll T_c$. Отметим, что вблизи точки перехода фононная и тороидная моды перепутываются в меру инварианта $\Gamma \mathbf{P}_\phi$, \mathbf{P}_ϕ — поляризация, связанная с решеточным колебанием, поэтому можно ожидать их значительного взаимного влияния, если частота мягкой фононной моды Ω_ϕ очень близка к частоте Ω_T . Применимость лагранжиана (1) и выражения (4) ограничена также областью низких частот $\omega \ll E_g$, где E_g — характерная энергия одноэлектронных возбуждений, порядка ширины запрещенной зоны полупроводника.

3. Зависимость $K_T(\omega)$ может сильно меняться в присутствии магнитного поля H . Добавляя в (1) слагаемое ⁴:

$$\Delta U = \eta T (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) \quad (7)$$

после несложных вычислений получим:

$$\chi_{\perp}(\omega) = - \frac{M_T [\xi^2 \omega^2 + \eta^2 H^2]}{\omega^2 - \Omega_T^2 - i \gamma_T \omega}, \quad \mathbf{E} \perp \mathbf{H}, \quad (8)$$

а при $\mathbf{E} \parallel \mathbf{H}$ формула (5) не изменяется. Не проводя здесь громоздкие вычисления $K_T(\omega)$ при $\mathbf{E} \perp \mathbf{H}$ укажем, что минимум $\omega_{T \max}^2 (\Omega_T)$ с ростом H смещается в сторону малых Ω_T и при $|\eta H_0| \sim |\xi \gamma_T|$ пропадает. В полупроводниковой модели типа ² имеем оценки:

$$\begin{aligned} \xi &\sim \frac{eP_{12}}{mE_g^2}, & \eta &\sim \frac{e^2 P_{12}}{cm^* m E_g^2}, \\ M_T &\sim E_g^2, \\ \mu_B H_0 &\sim \frac{m^*}{m} \gamma_T \end{aligned} \quad (9)$$

т. е. при $m^*/m \lesssim 10^{-1}$, $\gamma_T \sim \Omega_T \sim 10^{-2}$ эВ, $H_0 \lesssim 100$ кЭ.

Здесь P_{12} — межзонный матричный элемент импульса, m^* — эффективная масса, m — масса электрона, E_g — ширина запрещенной зоны, μ_B — магнетон Бора. Таким образом, по изменению $K_T(\omega)$ в магнитном поле при различных ориентациях вектора поляризации света можно надеяться идентифицировать тороидную моду колебаний даже при $H \ll H_0$. Было бы интересно провести соответствующие измерения в TlGaSe_2 .

Легирование дипольной примесью может привести к подавлению сегнетоэлектрического перехода и сделать более выгодным тороидный переход. В этом случае минимум $K_T(\omega)$ будет еще более ярко выражен, а в магнитном поле будет иметь место расходимость статической диэлектрической восприимчивости $\chi_{\perp}(0)$:

$$\chi_{\perp}(0) = \frac{M_T \eta^2 H^2}{\Omega_T^2} \rightarrow \infty, \quad \Omega_T \rightarrow 0. \quad (10)$$

В то же время $\chi_{\parallel}(0) = 0$ и не испытывает никаких аномалий в точке тороидного перехода.

4. Отмеченные особенности оптических характеристик могут иметь место и в антиферромагнетиках с локализованными моментами, если группа магнитной симметрии кристалла допускает инварианты вида $T_i L_j$ ($i, j = x, y, z$, L — вектор антиферромагнетизма). При этом тороидный момент зонных электронов T индуцируется в меру спин-орбитального взаимодействия, а инвариант типа $L \dot{E}$ в функционале антиферромагнетика содержит релятивистскую малость.

Авторы выражают благодарность Б.А.Волкову, А.А.Волкову, Г.В.Козлову, В.А.Зайцу за полезное обсуждение результатов работы.

Литература

1. Волков А.А., Гончаров Ю.Г., Козлов Г.В., Сардалы Р.М. Письма в ЖЭТФ, 1984, 39, 293.
2. Волков Б.А., Горбачевич А.А., Конаев Ю.В., Тугушев В.В. ЖЭТФ, 1981, 81, 729; 81, 1906.
3. Дубовик В.М., Тосунян Л.А. ЭЧАЯ, 1983, 14, 1193.
4. Горбачевич А.А., Конаев Ю.В., Тугушев В.В. ЖЭТФ, 1983, 85, 1107.
5. Миллер М.А. УФН, 1984, 142, 147.